

А.М. ЛЕВТЕРОВ, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., ИПМаш НАНУ,
Харьков;

Л.И. ЛЕВТЕРОВА, вед. инженер, ИПМаш НАНУ, Харьков

АНАЛИЗ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ МЕХАНИЗМА САЖЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ СЖИГАНИИ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ

Рассмотрены и проанализированы различные модели механизма образования сажи при сжигании углеводородных топлив в камерах сгорания энергетических установок. Выбраны модели, наиболее пригодные для использования в численном моделировании рабочего процесса дизеля.

Ключевые слова: рабочий процесс, дизель, сажа, полициклические ароматические углеводороды, ацетилен, радикалы.

Введение и постановка задачи. Изучение процесса образования сажи при горении углеводородов представляет трудную, но крайне важную задачу, так как имеет большое практическое значение. С одной стороны, сажа, точнее технический углерод, – важное технологическое сырье, производимое в мировом масштабе в количестве 10^7 тонн, идущее на производство шин, пластмасс, лакокрасочных изделий, применяется в копировальных аппаратах и лазерных принтерах; с другой стороны, сажа создает серьезные проблемы для окружающей среды при сжигании углеводородного топлива в промышленных энергоустановках. Так, дизельные двигатели примерно 10 – 20% введенного топлива сначала превращают в сажу [1]. Эмиссия сажи дизельных двигателей составляет значительную часть аэрозоля в атмосфере и зависит от параметров работы двигателя. Снижение вредных выбросов автотранспорта связано с созданием фильтрующих материалов, оптимизацией процессов сгорания, применением альтернативных топлив. Для осуществления этих мероприятий необходимо полное представление о выбросах, точная диагностика быстропотекающих процессов, современные методы измерений и адекватные модели сажеобразования. Частицы сажи формируются в зонах камеры сгорания, обогащенных топливом, в результате неполной его конверсии в CO_2 и H_2O , являющихся основными продуктами окисления углеводородных топлив. Попадание сажи в окружающую среду влияет на климат, наносит вред здоровью, так как природа сажи канцерогенна; она является носителем и/или накопителем канцерогенных веществ, в том числе бенз(а)пирена.

Модели образования сажи. Процесс сажеобразования – сложное физико-химическое явление. До настоящего времени нет общепринятой концепции сажеобразования и структуры сажевых частиц, а, следовательно, и микроскопической модели процесса. Выдающиеся специалисты в области производства технического углерода *Суровикин В. Ф., Теснер П. А., Кре-*

стинина А.В., Зуев В.П., Frenklach M., Nagle J., Bockhorn H. и другие внесли значительный вклад в понимание процесса сажеобразования, и за последние 30 лет достигнут определенный прогресс в области понимания механизмов образования сажевых частиц. К настоящему времени известно несколько гипотез, но установление детального механизма сажеобразования по-прежнему остается важной фундаментальной проблемой науки о горении, природа сажи остается предметом интенсивных исследований. Теория процесса сажеобразования обычно сводится к описанию качественных кинетических моделей. Опираясь на теоретические и экспериментальные разработки, изложенные в публикациях [2 – 5] и многих других, связанных с этой проблемой и изученных авторами, сделаем попытку выделения определяющих основ для решения нашей задачи – понимания процесса образования сажи в дизелях и снижения ее эмиссии с отработавшими газами.

Независимо от типа углеводородного топлива, но в зависимости от условий протекания реакций горения, молекулы топлива подвергаются либо пиролизу, либо окислительному пиролизу в более мелкие, простейшие углеводороды и углеводородные радикалы. Считается, что формирование сажевых частиц начинается с пиролиза углеводородных молекул и заканчивается последующей «сборкой» конденсированных частиц, когда осуществляется переход от газовой фазы и частицы идентифицируются как твердое тело. Химический процесс превращения углеводородных газообразных и жидких веществ в твердый углерод сопровождается физическим процессом возникновения новой дисперсной фазы. Сформировавшиеся частицы сажи содержат $10^5 - 10^6$ атомов углерода, имеют диаметр, начиная с минимального от 2 нм до 40–150 нм. Исследования структуры сажи показывают, что она представляет собой агломераты (скопления) небольших частиц почти сферической формы, содержащих приблизительно до 4000 индивидуальных частиц [6]. Процесс формирования сажи зависит от вида топлива, условий горения, конструкции камеры сгорания, но в любом процессе сажеобразования можно выделить общие характерные стадии: разложение исходного углеводородного сырья на простейшие углеводороды; образование предшественников сажи; образование зародышей (ядер) сажи; поверхностный рост зародышей в процессе столкновений с реакционно способными промежуточными продуктами разложения топлива (радикалами) в газовой фазе; окисление сажевых частиц.

При молекулярной массе предшественников $\sim 500 - 2500$ атомных единиц массы осуществляется переход от ядра к индивидуальным частицам сажи. Процессы коагуляции и агломерации (укрупнения) при столкновении зародышей и/или индивидуальных частиц сажи проходят под действием сил притяжения Ван-дер-Ваальса и в результате химических реакций. Малые частицы, объединяясь, увеличивают свою поверхность, адсорбируя окружающие молекулы газовой фазы. Коагуляция и агломерация не уменьшают общую долю сажи в продуктах сгорания, но, сокращая количество частиц, увеличивают размеры «объединений». Поверхностный рост происходит быстро, определяется конечный размер агломерата, а затем

сформированные частицы окисляются молекулами кислорода или радикалами ОН.

Перед формированием сажевых частиц наблюдается доминирование по концентрации в зоне сажеобразования углеводородов типа ароматических моно- и полициклических – (бензол, толуол, ксилол, нафталин и другие), и полииновых цепочек, молекул типа $C_{2n}H_2$ ($n = 2, 3, \dots$), в частности ацетилена. В связи с этим сформировались две основные гипотезы сажеобразования – *ароматическая* и *ацетиленовая*, которые базируются на двух разных семействах углеводородных молекул – предвестников (или предшественников сажи). Впрочем, есть гипотезы, объединяющие оба эти процесса.

В полииновых моделях сажеобразования предполагается, что каждый радикал, способный образовать полииновые комплексы, становится центром полимеризации, образование сажевых частиц трактуется как процесс разветвленной радикально-цепной полимеризации. Молекулы ацетилена и других полиинов имеют высокую термическую стабильность, и благодаря этому сохраняются в газовой фазе как стабильные структуры частиц углевода.

В полиароматической модели островками стабильности выступают другие предвестники сажи – полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), являющиеся промежуточным звеном между молекулами топлива и сажеобразованием, сопровождающим пиролиз топлива. Ароматические молекулы образуют устойчивые соединения – димеры, тримеры, тетрамеры и так далее. Моделирование роста полиароматических молекул проходит в основном по известному и широко используемому *механизму HACA* (Hydrogen–Abstraction–Carbon–Addition).

Вопрос о преимуществах моделей оставим решать специалистам и обратимся к рассмотрению и выбору модели образования сажи, пригодной в исследованиях сгорания в дизелях. Хотя механизм формирования сажевых частиц в пламени камер сгорания различных энергоустановок практически один и тот же, существуют особенности режимов горения в конкретных системах, и они заметным образом могут влиять на эмиссию сажевых частиц в атмосферу. Такая система, как дизельный двигатель, в силу высокой температуры в камере сгорания создает благоприятные условия для образования сажи, особенно на ранней стадии процесса сгорания; в процессе участвуют сотни и даже тысячи реакций промежуточных и радикальных разновидностей. Формирование и развитие твердых макрочастиц – химический и физический процессы, подобные формированию полииновых и ароматических углеводородов, с последующим преобразованием в твердые частицы, которые накапливаются газообразными компонентами продуктов сгорания топлива. Несмотря на значительный прогресс в понимании закономерностей образования сажи и разнообразие моделей, численной модели, способной количественно предсказать основные свойства сажевых частиц по размеру, заряду, свойствам поверхности, составу, структуре, пока нет. Существуют многочисленные гипотезы.

Особенности моделирования образования сажи в дизелях. Естественно, что было бы претенциозно перенести достижения фундаментальной науки о формировании сажи непосредственно в моделирование сажеобразования в дизеле. Для моделирования в дизеле этот процесс необходимо рассматривать в силу особенностей организации процесса сгорания топлива в камере сгорания и с учетом того, что моделирование процессов в двигателе представляет собой сочетание описания многих физико-химических явлений, возможностей и задач.

Надо обязательно оговорить, что исследование сажеобразования в дизеле возможно только при наличии полной математической модели рабочего цикла дизеля, которая дает возможность получения параметров, оказывающих прямое воздействие на процесс. Кроме того, важным является моделирование подачи топлива, его распространения по объему камеры сгорания, испарения, перемешивания с воздухом и, конечно, собственно сгорания. В качестве модели двигателя могут выступать стандартные комплексы KIVA, STAR-CD и их модификации, и разнообразные термодинамические модели.

Показано, что сажа формируется в ограниченных пределах температур $\sim 1300 - 1600$ К [7], влияют также тип и вид топлива, соотношение воздух/топливо, давление, обогащенность смеси.

При всем разнообразии моделей в качестве предшественников сажи полагается ацетилен, реже ПАУ, так как механизм реакций для этих разновидностей более обширен и, следовательно, требует большего времени на вычислительный процесс и, как правило, большей эмпирики в данных о реакциях. Мономер сажи, состоящий из двух атомов углерода, символизируется реакцией $C_{2n}H_2 \Rightarrow 2C_s + H_2$.

Способ выражения скорости химической реакции находится в соответствии с *уравнением Аррениуса*, где главные эмпирические данные в константе скорости реакции касаются предэкспоненциального члена (A) и значения энергии активации (E):

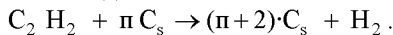
$$k = A \exp(-E/RT).$$

Происхождение зародыша сажи объясняется по-разному *Суровикиным* и *Теслером*, и это по-прежнему остается предметом исследований. Например, с 1985 года появилось понятие *фуллеренов*, то есть такого соединения атомов углерода, когда каждый атом углерода связан с тремя другими атомами углерода. *Березкин В.И.* [8] строит свою гипотезу образования зародышей сажи с привлечением этого понятия. Наиболее приемлемым является предположение, что зародыш, уплотняясь, содержит несколько мономеров сажи, чаще 16, то есть 32 атома углерода [9]. Допускают и другое содержание атомов углерода в ядре, например, 100, но конечный результат мало зависит от первого приближения размера частицы. Важно, чтобы он оставался в пределах диапазона 1 – 10 нм. При допущении сферической формы ядра и общепринятой плотности сажи ρ_s в пределах (1,8 – 2,0) г/см³, средний диаметр частицы можно получить из соотношения $\pi d^3 / 6 = m_s / \rho_s$, где m_s – масса зародыша сажи.

Скорость зарождения ядра $d[Z]/dt$ находится, опираясь на фундаментальное положение о ее пропорциональности скорости образования предшественников сажи C_2H_2 или ПАУ, из выражения

$$d[Z]/dt = 1,0 \cdot 10^4 \exp(21,100/T) [C_2H_2] \text{ моль}/(\text{см}^3 \cdot \text{с}).$$

Схематичная реакция адсорбции ацетилена на поверхности зародившейся частицы сажи имеет вид



Детально рост поверхности сажи рассчитывается с использованием механизма НАСА.

Шаг, моделирующий укрупнение сажевых образований (коагуляция и агломерация), символизируется уравнением $nC_s \rightarrow C_{ns}$.

Окисление сажевых образований происходит в узкой области, близкой к пламени, атомами кислорода и радикалами ОН. Для конкретных моделей выражения для вычисления концентраций в виде дифференциальных уравнений проводится в соответствии с правилами описания кинетики сложной химической реакции.

Математические модели образования сажи в двигателе располагаются от полумпирических и феноменологических до детальных физико-химических моделей, построенных на уравнениях химической кинетики. В большинстве исследований предпочитают использовать модели сажеобразования, сочетающие легкость в исполнении и задании исходных параметров и небольшие потребности во времени расчета. Такие модели основаны на качественном описании главных особенностей процесса формирования сажи.

Первая попытка моделирования сажеобразования в дизеле была принята в начале 70-х годов. Более полные модели появились и развивались позднее (они развиваются и совершенствуются по сей день), основываясь на кинетическом подходе к формированию сажи. Можно утверждать, что к настоящему времени сформировался определенный круг моделей образования сажи в дизелях, который используется как в феноменологических моделях сгорания в дизеле, так и в 3-мерном моделировании этого процесса. При моделировании рабочих процессов наблюдается стремление к созданию моделей образования сажи, пригодных для практического использования с максимально возможным охватом описания физико-химического процесса и возможностью несложного интегрирования в существующие модели двигателей.

Математические модели образования сажи можно разделить на модели с детальным механизмом проходящих при сгорании топливовоздушной смеси химических реакций и модели с упрощенным механизмом. Детальные многошаговые химические модели формирования и окисления сажи используются в канонических системах ламинарного и турбулентного горения, требуют больших вычислительных затрат. По утверждению некоторых исследователей, разница в расчетных прогнозах обоих видов моделей по сравнению с экспериментальными данными невелика и направлена в

сторону увеличения образования сажи.

По типу модели образования сажи делятся на три категории: *полуэмпирические, феноменологические, статистические*. Последние при незначительных вычислительных затратах для получения усредненного результата требуют значительных по количеству экспериментальных измерений и рассматриваться не будут.

Достойным и востребованным представителем полуэмпирических моделей вот уже несколько десятилетий является *двухступенчатый механизм образования сажи Hiroyasu* [10], включающий два уравнения: скорость формирования сажи

$$dm_{sf} / dt = A_f \cdot m_f \cdot p^{0.5} \exp(E_f / RT),$$

и скорость ее окисления

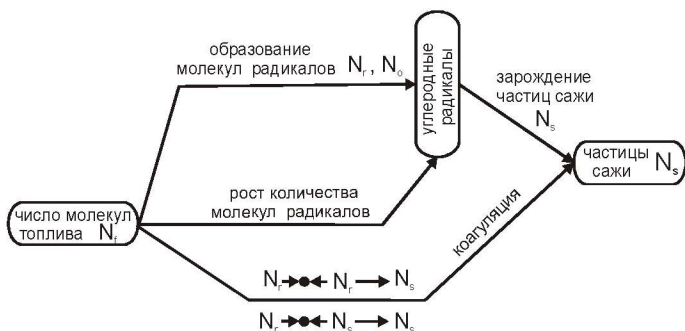
$$dm_{so} / dt = A_o \cdot m_{sf} \cdot [O_2] \cdot p^{1.8} \exp(E_o / RT),$$

где m_f , m_{sf} , m_{so} – массы топлива, сформировавшейся и окислившейся сажи, соответственно; A_f , A_o – калибровочные константы, определяемые типом двигателя; E_f , E_o – энергия активации реакций формирования и окисления сажи; R – универсальная газовая постоянная; p , T – давление и температура в цилиндре двигателя; $[O_2]$ – мольная концентрация кислорода в продуктах сгорания.

Модель Hiroyasu может и используется в однозонных, двух- и многозонных моделях сгорания, в моделях CFD [11 – 13]. Единственным ограничением является необходимость настройки модели с помощью эксперимента в случае изменения геометрии двигателя. По этой причине в средствах проектирования двигателей модель используется редко, но продолжает широко применяться в задачах оптимизации и прогнозирования процессов в поршневых двигателях.

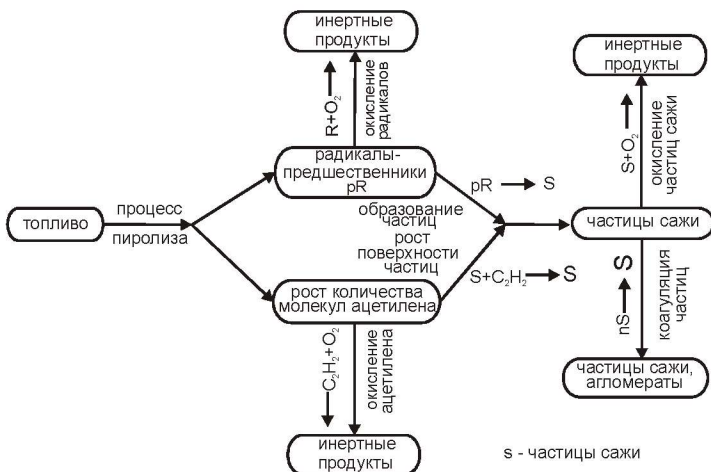
Категория феноменологических моделей образования сажи, которые связывают эмпирические наблюдения за явлением с основными фундаментальными теоретическими положениями о нем, представлена моделями *Сузовикина* и *Fusco* [14, 15], (см. рис. 1, а, б). На базе этих моделей создано много модификаций, связанных или с упрощением модели, или с усложнением в сторону детализации [16]. Такие модели чаще используются в стандартных коммерческих комплексах моделирования двигателей.

Общим фундаментальным положением моделей сажеобразования Сузовикина и Fusco является постулат о пропорциональности образования первичных частиц сажи (ядер) образованию углеводорода C_2H_2 (ацетилена) в результате пиролиза топливных молекул при частичном недостатке кислорода $C_2H_2 \rightarrow 2C_2 + H_2$ со скоростью $d[Z]/dt$. Главной эмпирической составляющей моделей при недостатке данных о вспомогательных реакциях становятся константы скоростей реакций.



N_o – молекулы радикалов, образовавшиеся в результате пиролиза топлива;
 N_r – молекулы радикалов, образовавшиеся в результате реакций разветвления (цепных реакций)

a – модель Суровикина



b – модель Fusco

Рис. 1 – Модели образования сажи.

Суровикин предполагает, что формирования ядра частицы сажи и его рост, а также формирование и рост частиц сажи, – различные стадии одного процесса, накладываемые одна на другую с различными механизмами. Таким образом, образование сажи идет в три этапа: формирование радикального ядра; рост радикальных ядер и преобразование их в сажевые частицы после достижения критического диаметра ($12,5 \cdot 10^{-8}$ см); дальнейший рост частиц. Предполагается, что частицы сажи (радикальные молекулы), образовавшиеся в результате пиролиза топлива, сталкиваясь между собой и с молекулами топлива, увеличиваются в размере. Число радикальных молекул (N_r) определяется соотношением

$$dN_r / dt = N_o + F_o \cdot N_r - G_o \cdot N_r - k_o \cdot N_r^2 \cdot N_p,$$

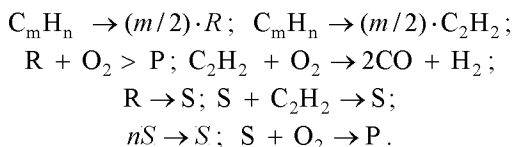
где первый член зависимости – образование количества радикальных молекул в результате пиролиза; второй – в результате разветвленных (цепных) реакций; третий и четвертый – определяют уменьшение количества частиц за счет столкновений с радикалами и молекулами топлива соответственно. Количество этих частиц находится с помощью коэффициентов G_o и k_o , полученных в соответствии с теорией соударений элементарных частиц. Первоначально образованное число молекул сажи (N_p) Суруикин определяет, вводя понятие фиктивного количества радикальных молекул (N_{fict}) и коэффициента изменения скорости роста количества радикалов за все время сажеобразования (k_v):

$$dN_p / dt = k_v dN_{fict} / dt.$$

Далее образовавшаяся фракция сажи рассчитывается по известным зависимостям, включающим число частиц, их диаметр, плотность и массу.

Стандартный программный комплекс KIVA-3V использует именно эту модель формирования сажи Суруикина, окисление сажи учитывается по процедуре Wagner с константами по Nagle [17], KIVA-2 оснащена моделью Hiroyasu в совокупности с моделью окисления Nagle.

Модель образования сажи Fusco включает восемь химических реакций, описывающих формирование радикалов в результате пиролиза топлива, формирование молекул ацетилена, окисление радикалов и ацетилена, образование ядра сажи (начало роста частиц), рост частиц, окисление сажевых частиц:

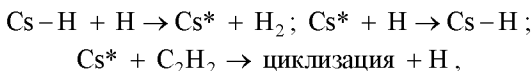


Выражения для скоростей реакций находятся в зависимости от концентрации компонент реакционной смеси. Константы скоростей реакций выражаются в общепринятой форме: $k = A e^{-E_A/RT}$.

Разница в подходах к моделированию формирования сажи в рассматриваемых моделях объясняется разницей в предполагаемом фундаментальном механизме химических реакций. По Суруикину рост сажи осуществляется за счет столкновений радикалов, а также радикалов и топлива в соответствии с положениями *теории столкновений*; по Fusco главный формирователь сажи – ацетилен. Общее в моделях: причина возникновения сажи – пиролиз топлива при недостатке кислорода с последующим возникновением радикалов–предшественников.

Общую массу сформировавшейся сажи определяют как процессы роста поверхности, так и процессы окисления поверхности. Один из ключевых аспектов формирования сажи – рост поверхности в результате реакций радикальных веществ газовой фазы с веществами на поверхности сажи. Общеизвестно, что общая площадь поверхности частиц (A_s) отличается от пло-

щади поверхности с активными центрами, специфическими локальными участками на поверхности сажи, где и происходят реакции, обеспечивающие сажевый рост. По интерпретации физической сути возникновения активных центров в исследовательском мире существуют разногласия, но упрощенный механизм возникновения центров рассматривается как следствие обогащения зоны поверхности сажи водородом с последующим отрывом атомов водорода и присоединением ацетилена C_2H_2 . Это положение и составляет основу механизма роста поверхности сажи, получившего название НАСА, предложенного Френкляхом [18, 19]. Минимальный механизм химических реакций роста поверхности сажи в соответствии с [19] для каждого из активных центров имеет вид



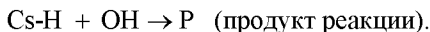
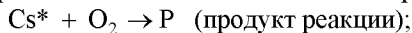
где Cs – углеродистый атом на внешней поверхности частицы; Cs* – активная область (центр) на внешней поверхности частицы.

Стохастическая процедура роста поверхности моделируется как *марковская последовательность* [18]. Результаты столкновений между данной газовой химической разновидностью j с данным местоположением i определяются условной вероятностью реакций столкновений

$$\nu_f = S \cdot z_f \cdot C_f = N \cdot s \left(\frac{k_b T}{2\pi \cdot M_f} \right)^{1/2} \cdot C_f,$$

где k_b – постоянная Больцмана; M_f – молекулярная масса; C_f – молярная концентрация вещества j ; z_f – молекулярный поток вещества j к поверхности; S – полная площадь поверхности нижнего слоя; N – общее количество активных центров на поверхности; s – область одного местоположения (активного центра), которая принята равной $1,42 \cdot 3,5 \text{ \AA}^2$, где $1,42 \text{ \AA}$ – длина ароматической связи C–C; $3,5 \text{ \AA}$ – интервал между активными центрами.

Рассмотрение процесса окисления сажи добавляет реакции



Система уравнений, которая описывает детальный механизм НАСА, насчитывает до 1700 газофазных реакций с участием 140 компонентов и решается *методом Монте-Карло*. Механизм роста поверхности НАСА в упрощенном виде часто дополняет модель Fusco.

Результирующая скорость образования сажи в цилиндре двигателя, собственно и являющаяся моделью сажеобразования, разработанной Разлейцевым [20] и затем уточненная Кулешовым, в представлении Звонова [21] выглядит следующим образом:

$$\frac{d[C]}{d\tau} = B \left(\frac{d[C]}{d\tau} \right)_k + B \left(\frac{d[C]}{d\tau} \right)_n - \frac{1}{B} \left(\frac{d[C]}{d\tau} \right)_b - \left(\frac{d[C]}{d\tau} \right)_v.$$

Здесь первый член в зависимости справа – скорость формирования сажи $(d[C]/d\tau)_k = 0.004(q_c/V) \cdot (dx/d\tau)$,

где V – текущий объем цилиндра; q_c – цикловая подача топлива; $dx/d\tau$ – скорость тепловыделения; второй член связывает скорость сажеобразования со скоростью исчезновения жидких капель вследствие их полного испарения; третий член – скорость выгорания (окисления) сажи; четвертый член – уменьшение объема концентрации сажи вследствие расширения газа в цилиндре.

Коэффициент

$$B = A(n_{\text{ном}}/n)^m,$$

где n – частота вращения коленчатого вала двигателя, A и m – эмпирические коэффициенты.

Анализ зависимости показывает, как сильно зависит результат вычислений от многочисленных эмпирических коэффициентов и выражений, сопровождающих не только выражение для образования сажи, но и сопутствующие определения: скорость тепловыделения, испарение капель, характеристики подачи топлива, которые в модели Разлейцева рабочего процесса дизеля, в свою очередь, сопрягаются с многочисленной эмпирикой, характерной для конкретного двигателя.

В работе [21] предлагается «на основании анализа работ различных исследователей феноменологический подход сажеобразования для принятого условного топлива $C_{14}H_{30}$ » (цитата), но этот подход представляет собой не что иное, как рассматриваемую выше модель образования сажи Fusco [15] в совокупности с моделью ее окисления по Nagle [17].

Особого внимания достойна простая и глобальная, по словам авторов, модель образования сажи в дизеле, основанная на детальной модели сажеобразования [22]. Разработана модель в *Институте химической физики им. Семенова* (Россия). Детальная модель включает в себя механизмы формирования ПАУ и полиинов; два механизма образования зародышей сажи; рост сажевых частиц в реакциях механизма НАСА и вследствие присоединения полииновых молекул; механизм пиролиза ацетиленов и образование кластеров чистого углерода; механизм окисления n -гептана. Такая модель включает в себя 1850 газофазных реакций между 186 компонентами и 100 гетерогенных реакций из 4-х ансамблей микрогетерогенных частиц различных типов.

В свою очередь, «для проверки детального механизма сажеобразования результаты расчетов зависимости выхода сажи от температуры, скорость роста частиц, время индукции процесса сажеобразования при пиролизе различных углеводородов сравнивались с экспериментальным результатом, полученным с помощью измерений поглощения лазерного излучения за отраженными ударными волнами» цитата из [22]. Хорошее согласование этих результатов указывает на качественную и количественную адекватность детальной кинетической схемы сажеобразования.

В виду того что такая схема не может быть внедрена в программное обеспечение для газодинамических расчетов, сопровождающих моделирование рабочих процессов в дизеле из-за длительности времени расчета, на ее базе был разработан механизм, основанный на сделанных в моделировании сажеобразования допущениях. Суть допущений сводится к нескольким положениям: про-

процесс окисления топлива происходит до получения H_2O и CO_2 ; процесс окисления сажи в богатых смесях осуществляется кислородом и водой; вода и кислород не расходуются в реакциях окисления сажи. Работоспособность такого механизма, включающего четыре реакции:

окисления топлива: $\text{C}_n\text{H}_m + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O}$,

образования сажи $\text{C}_n\text{H}_m + \text{C}_n\text{H}_m \rightarrow 2n\text{C} + \text{P}$,

окисления сажи кислородом: $\text{C} + \text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{P}$,

окисления сажи водой: $\text{C} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{P}$,

была проверена при окислении н-тетрадектана воздухом в реакторе и на 3-х мерной модели исследуемого двигателя. Результаты дали хорошее совпадение измеренного и рассчитанного по этой модели количества сажи на разных режимах работы двигателя.

Вывод. Перечень моделей образования сажи и их характеристики можно было бы продолжить и коснуться моделей, учитывающих динамику выделения и размеры сажевых частиц, что важно, поскольку именно мелкие частицы, попадая в легкие с воздухом, там и остаются. Но мы позволим себе рассмотрение моделей на этом закончить, а на основании проведенного анализа для своих дальнейших исследований рабочих процессов в поршневых двигателях руководствоваться моделями сажеобразования по Hiroyasu и Fusco как наиболее адаптивными к рабочему циклу дизеля.

Список литературы: 1. Новоселов А.Л., Пролубников В.И., Тубалов Н.П. Совершенствование очистки отработавших газов дизелей на основе СВС-материалов. – Новосибирск: Наука, 2002. – 96 с. 2. [Surovikin V.F., Shaitanov A. Formation and growth of dispersed carbon particles during pyrolysis of ethylene, benzene, and naphthalene in a reflected shock wave // COMBUSTION, EXPLOSION, AND SHOCK WAVES. – 2007. – Vol. 43, №4. – P. 442–448.](#) 3. Суровикин В.Ф., Теснер П.А. Образование сажи при разложении углеводородов в высокотемпературном потоке продуктов полного сгорания // Газовая промышленность. – 1965, №. 5. – С. 44–50. 4. Крестинин А.В. О механизме образования сажи из ацетилена // Химическая физика. – 1994. – Т. 13, № 1. – С. 121–131. 5. Крестинин А.В. Образование сажевых частиц как процесс химической конденсации полиинов // Химическая физика. – 1998. – Т. 17, №. 8. – С. 41–56. 6. Heywood J.B. Internal Combustion Engine Fundamental. – New York: McGraw– Hill, 1988. – 930 p. 7. Santoro R., Yeh T., Horvath J. The transport and growth of soot particles in laminar diffusion flames/R. Santoro, //Combustion Science and Technology. –1987. – Vol. 53. –P. 89–115. 8. Березкин В.И. Фуллерены как зародыши сажевых частиц //ФТТ.–2000.–Т.42, № 3. – С. 567–572. 9. Appel J., Bockhorn H., Frenklach M. Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics Laminar premixed flames of C_2 hydrocarbons // Combust. Flame. –2000, № 121.– P. 122–136. 10. Hiroyasu H., Kadota T., Arai M. Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions (part. 1) //Bulletin of the JSME, 1983.– Vol. 26.–№214.– P. 569 – 575. 11. Rakopoulos C.D., Dimaratos A., Giakoumis E. Exhaust emissions estimation during transient turbocharged diesel engine operation using a two-zone combustion model // In: Vehicle Design. –2009. – Vol. 49, №. 1/2. –P. 125 – 149. 12. Jung D., Assanis D. Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Cycle Simulation Studies of Engine Performance and Emissions // SAE Techn. Pap. Ser. – 2001. – 2001-01-1246. – 22 p. 13. Boussouara K., Kadja M. Numerical investigation of soot formation in diesel jet flame with KIVA-3V // Revue des Energies Renouvelables. –2009. –Vol. 12, №1. – P. 55 – 62. 14. Суровикин В.Ф. Аналитическое описание процессов зародышеобразования и роста частиц сажи при термическом разложении ароматических углеводородов в газовой фазе // Химия твердого топлива.– 1976.– №. 1.– С. 111–122. 15. Fusco A., Knox-Kelecay A., Foster D. Application of a Phenomenological Soot Model to Diesel Engine Combustion //In: International Symposium COMMODIA, Tokyo. – 1994. – P. – 571 – 576. 16. Dennis N., Assanis A., Heinz P. Development and application of a comprehensive soot model for 3D CFD reacting flow studies in a diesel engine //Combustion and Flame ,143. – 2005. – P. 11–26.

17. Nagle J., Strickland-Constable Oxidation of carbon between 1000–2000°C.F. // Proceedings of the Fifth Conference on Carbon, London, Pergamon Press. – 1962. – P.154–164. 18. Frenklach M. On surface growth mechanism of soot particles// Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion, Proc. Combust. Inst., 1996. –P. 2285–2293 19. Frenklach M., Wang H. Detailed modeling of soot particle nucleation and growth //Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, Proc. Combust. Inst.– 1991, 23.–P. 1559–1566. 20. Разлейцев Н.Ф. Моделирование и оптимизация процесса сгорания в дизелях. –Харьков: Вища школа, 1980. – 169 с. 21. Звонов В.А., Корнилов Г.С., Козлов А.В. Оценка и контроль выбросов дисперсных частиц с отработавшими газами дизелей. – М.: Из-во Прима-Пресс-М, 2005. –312 с. 22. Басевич В.Я., Власов П.А., Фролов С.М. Моделирование сажеобразования в двигателях внутреннего сгорания. – Горение и взрыв: Сб. трудов под ред. Фролова. – 2008, Вып 1. – 112 с.

Поступила в редколлегию 07.02.2013 г.

УДК 621.43

Аналіз математических моделей механізму сажеобрановання при сжиганні углеводородных топлив / А. М. Левтеров, Л. И. Левтерова // Вісник НТУ «ХПІ». Серія: Математичне моделювання в техніці та технологіях. – Харків: НТУ «ХПІ», 2013. – №5 (979). – С. 130-141. Бібліогр.: 21 назва.

Розглянуто побудову математичної моделі робочого циклу дизеля з безпосереднім впорскуванням. Передбачається прогнозування робочих характеристик дизеля, що працює на традиційному і альтернативному паливах з урахуванням емісії шкідливих складових у відпрацьованих газах, у тому числі й сажі, що є особливо важливим для цього типу поршневих двигунів.

Ключові слова: робочий процес, дизель, сажа, поліциклічні ароматичні вуглеводні, ацетилен, радикали, оксиди азоту.

This article discusses the construction of a mathematical model of the operating cycle of diesel engine with direct injection. This paper also provides that result of modeling becomes possible predict the performance of diesel engine on traditional and alternative fuels with the emission of harmful substances in the exhaust gases, including carbon black, which is particularly important for this type of piston engines.

Key words: working process, diesel, soot, polycyclic aromatic hydrocarbons, acetylene, radicals, nitrogen oxides.

УДК 621.43

А.М. ЛЕВТЕРОВ, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., ИПМаш НАНУ,
Харьков;

Л.И. ЛЕВТЕРОВА, вед. инженер, ИПМаш НАНУ, Харьков

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОЧЕГО ЦИКЛА ДИЗЕЛЯ С НЕПОСРЕДСТВЕННЫМ ВПРЫСКОМ. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ЭМИССИИ САЖИ И ОКСИДОВ АЗОТА

Рассматривается построение математической модели рабочего цикла дизельного двигателя с непосредственным впрыском. Предусматривается прогнозирование рабочих характеристик дизеля на традиционном и альтернативном топливах с учетом эмиссии вредных составляющих в отработавших газах, в том числе сажи, что является особенно важным для этой категории поршневых двигателей.

Ключевые слова: рабочий процесс, дизель, сажа, полициклические ароматические углеводороды, ацетилен, радикалы, оксиды азота.

© А. М. Левтеров, Л. И. Левтерова, 2013